



INTEGRAÇÃO DE CONTROLE AVANÇADO COM A OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL USANDO MECANISMO ADAPTATIVO DE CHAVEAMENTO

Palavras-Chave: MODELO DE CONTROLE PREDITIVO, CHAVEAMENTO ADAPTATIVO, MODELO LINEAR, POLIMERIZAÇÃO ESTIRENO

Autores(as):

MIGUEL DUTRA DE CARVALHO, FEQ – UNICAMP

Prof.^a Dr.^a LUZ ADRIANA ALVAREZ TORO, FEQ – UNICAMP

INTRODUÇÃO:

O propósito dos processos químicos industriais é produzir um produto a partir de umas matérias primas. A operação eficiente e segura de esses processos pode ser alcançada pelo projeto de sistemas de controle. A busca por obter uma maior produtividade levou ao desenvolvimento de controladores SISO (Single Input-Single Output), principalmente o PID, com implementação simples, rápida e de baixo custo. Entretanto, a necessidade de considerar restrições e a natureza multivariável dos processos, aliados ao fato da integração resultar em modificações na dinâmica da planta, sistemas de controle mais complexos foram estudados, buscando o melhor desempenho operacional possível (BALDEA; HARJUNKOSKI, 2014). Assim, técnicas de controle avançado como o controle preditivo MPC (Model Predictive Control) foram difundidas em muitas aplicações, satisfazendo muitas das necessidades de controle desses processos (QIN; BADGWELL, 2003). De modo geral, o termo MPC se refere a uma família de controladores que tem como características principais o uso de um modelo de predição e a resolução a cada tempo de amostragem de um problema de otimização sujeito a um conjunto de restrições (CAMACHO; ALBA, 2013). Nesse contexto, é possível implementar também a otimização em tempo real (RTO – Real Time Optimization), que permite maximizar o lucro econômico na presença de perturbações. A otimização em tempo real é implementada em uma estrutura hierárquica com o controle preditivo e os controladores locais, que operam a frequências menores (ALVAREZ; ODLOAK, 2012).

Trabalhos recentes do grupo de pesquisa (OLIVEIRA; CARVALHO; ALVAREZ, 2019; OLIVEIRA, 2019) apresentam uma formulação adaptativa para a integração da RTO com o MPC considerando múltiplos modelos lineares, com cada um desses modelos representando diferentes pontos de operação do processo. Nessa formulação de controle é calculada como uma combinação linear das ações do MPC correspondentes a cada modelo linear. Esta estrutura se mostrou capaz de maximizar o lucro econômico em presença de perturbações, mantendo também o desempenho dinâmico. Entretanto, a execução de múltiplos problemas de otimização na estrutura completa resulta

em uma carga computacional importante para aplicações de controle, que precisam de tempos pequenos. Sendo assim, a proposta neste projeto é criar um mecanismo adaptativo mais simples do ponto de vista computacional: fazer um chaveamento em tempo real dos modelos lineares ao invés de calcular uma combinação linear.

METODOLOGIA:

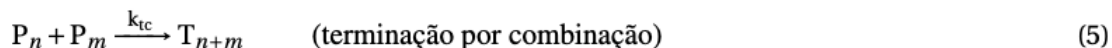
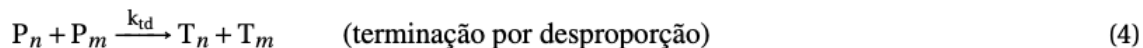
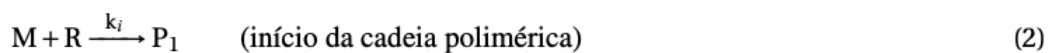
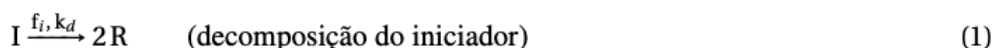
Estudo de Controle de Processos

Inicialmente, para se introduzir o tema da estrutura de controle avançado de processos do MPC e RTO, foi realizado um estudo geral sobre os conceitos de controle de processos. E em paralelo, foi necessário o estudo da linguagem de programação em MATLAB, pois não é ensinada no curso de Engenharia Química da UNICAMP, e para visualizar os conceitos na prática, foi utilizado para o estudo o código de MATLAB da dissertação da Oliveira (2019) no qual foi feito uma integração adaptativa da RTO com o MPC com múltiplos modelos. Por meio desses estudos, foram obtidos conhecimentos avançados em controle de processos e otimização de sistemas em tempo real, habilidades essenciais para o desenvolvimento do projeto de pesquisa.

Estudo do Processo

O estudo de caso dessa iniciação científica realizado refere-se a um reator contínuo de mistura perfeita (CSTR - Continuous Stirred-Tank Reactor) utilizado para a polimerização de estireno. A polimerização é um processo químico que envolve a combinação de diversos monômeros e é regida por um conjunto de reações que determinam o mecanismo de polimerização. No caso das reações de polimerização por radicais livres, geralmente existem duas etapas: a identificação do mecanismo cinético e a elaboração das equações diferenciais baseadas nos balanços de massa e energia.

Segundo Odian (2004), o mecanismo de polimerização que utiliza monômeros com ligações do tipo vinílica, como o estireno, geralmente apresenta três etapas (iniciação, propagação e terminação) e pode ser representado pelas seguintes reações (JAISINGHANI; RAY, 1977):



A etapa de iniciação é composta pelas duas primeiras reações (1) e (2). Nela, o iniciador (I) decompõe-se, gerando radicais livres (R). O radical livre, por sua vez, reage com as moléculas de monômero (M), dando início à cadeia polimérica (P₁). Durante a propagação (3), as cadeias crescem com adições sucessivas de monômeros a partir dos seus centros ativos. As cadeias crescerão enquanto seus centros ativos existirem. Na etapa de terminação, os centros ativos são desativados e as cadeias poliméricas finalizadas. Isso pode acontecer de duas maneiras: a partir da transferência de elétrons de

um centro ativo para outro (terminação por desproporção (4)), gerando duas cadeias poliméricas inativas (ou mortas) de tamanhos diferentes (T_n e T_m) ou através da junção das cadeias poliméricas ativas (terminação por combinação (5)), resultando em uma cadeia de polímero inativa (T_{n+m}) (OLIVEIRA, 2019).

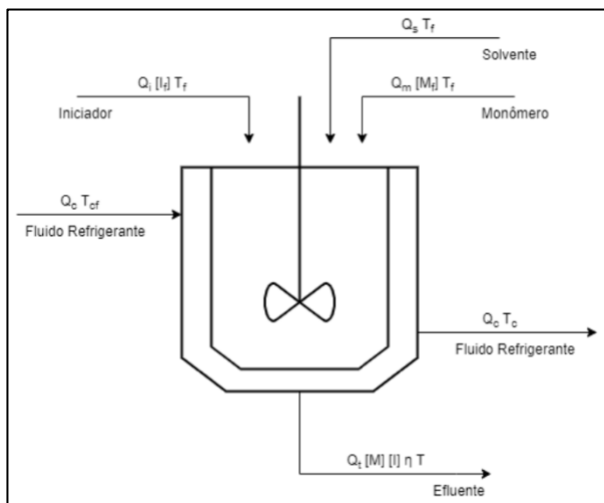


Figura 1 - Reator de polimerização de estireno. Adaptado de (ALVAREZ; ODLOAK, 2012)

Segundo Machado et al. (1996), existem diversas maneiras de dar início a um processo de polimerização. Na polimerização do estireno, a técnica mais utilizada é o emprego de compostos com ligações covalentes de baixa energia, como peróxidos ou azocompostos como iniciadores e que, sob condições energéticas brandas, liberam radicais livres altamente reativos. Essa técnica foi utilizada neste trabalho e o iniciador da polimerização foi definido como o 2,2'-azoisobutironitrila (AIBN) em benzeno.

Um diagrama esquemático do sistema é apresentado na Figura 1. O CSTR tem três correntes de alimentação: Q_i , Q_s e Q_m , que representam as taxas de fluxo do monômero de estireno, do solvente benzeno e do iniciador 2,2'-azoisobutironitrila (AIBN) em benzeno, respectivamente. A temperatura do reator é mantida pela vazão Q_c do fluido de resfriamento que circula na camisa, pois a reação de polimerização é altamente exotérmica e o fluido no sistema de refrigeração ameniza os efeitos térmicos sob a qualidade do polímero produzido. O efluente do reator é representado por Q_t e contém polímero, monômero não reagido, iniciador e solvente.

O modelo fenomenológico do processo é definido de acordo com Alvarez e Odloak (2012) e Hidalgo e Brosilow (1990) e leva em conta as seguintes suposições:

- A vida útil dos radicais poliméricos é extremamente curta se comparada a outras constantes de tempo do sistema, de modo que a variação nas concentrações de R e P_n são quase nulas;
- O consumo de monômero é principalmente devido à propagação, o que sugere à hipótese de polímeros finais de cadeia longa;
- Foram desconsideradas as reações de transferência de cadeia para o monômero e para o solvente;
- A iniciação térmica do monômero foi desconsiderada, já que esta é significativa apenas em temperaturas superiores a 373 K;
- A temperatura do reator considerada neste trabalho está abaixo do limite de 373 K;
- A constante de taxa de terminação da cadeia global, k_t , é definida como a soma das constantes de terminação por combinação, k_{tc} e de terminação por desproporção, k_{td} , ou seja, $k_t = k_{tc} + k_{td}$;

- A terminação por desproporção não é considerada, de modo que a terminação da cadeia ocorre apenas por combinação, ou seja, $k_t = k_{tc}$;
- A taxa de propagação é muito mais rápida que a taxa de terminação;
- O calor de reação da iniciação e o calor de reação da terminação podem ser considerados desprezíveis se comparados ao calor de reação da etapa de propagação.

A partir do mecanismo reacional e das considerações adotadas, os balanços de massa e energia são reduzidos às seguintes equações diferenciais:

$$\frac{d[I]}{dt} = \frac{Q_i[I_f] - Q_t[I]}{V} - k_d[I] \quad (6)$$

$$\frac{d[M]}{dt} = \frac{Q_m[M_f] - Q_t[M]}{V} - k_p[M][P] \quad (7)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{Q_t(T_f - T)}{V} + \frac{(-\Delta H_r)}{\rho C_p} k_p[M][P] - \frac{hA}{\rho C_p V} (T - T_c) \quad (8)$$

$$\frac{dD_0}{dt} = 0.5k_t[P]^2 - \frac{Q_t D_0}{V} \quad (9)$$

$$\frac{dD_1}{dt} = M_m k_p[M][P] - \frac{Q_t D_1}{V} \quad (10)$$

$$\frac{dD_2}{dt} = 5M_m k_p[M][P] + 3M_m \frac{k_p^2}{k_t} [M]^2 - \frac{Q_t D_2}{V} \quad (11)$$

Tabela 1 – Parâmetros do processo de polimerização.

| Variável | Definição | Valor |
|-----------------|--|-------------------------------------|
| A_d | Fator de frequência para a decomposição do iniciador | $2.142e17 \text{ h}^{-1}$ |
| E_d | Energia de ativação para a decomposição do iniciador | 14897 K |
| A_p | Fator de frequência para a reação de propagação | $3.816e10 \text{ L}/(\text{mol.h})$ |
| E_p | Energia de ativação para a reação de propagação | 3557 K |
| A_t | Fator de frequência para a reação de terminação | $4.50e12 \text{ L}/(\text{mol.h})$ |
| E_t | Energia de ativação para a reação de terminação | 843 K |
| f_i | Eficiência do iniciador | 0.6 |
| $-\Delta H_r$ | Calor de polimerização | $6.99e4 \text{ J/mol}$ |
| hA | Coeficiente de transferência de calor global | $1.05.6 \text{ J}/(\text{K.h})$ |
| ρC_p | Capacidade calorífica média do fluido do reator | $1506 \text{ J}/(\text{K.L})$ |
| $\rho_c C_{cp}$ | Capacidade calorífica do fluido refrigerante da camisa | $4043 \text{ J}/(\text{K.L})$ |
| M_m | Massa molecular do monômero | 104.14 g/mol |

(ALVAREZ; ODLOAK, 2012)

BIBLIOGRAFIA

ALVAREZ, L.; ODLOAK, D. Optimization and control of a continuous polymerization reactor. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, SciELO Brasil, v. 29, p. 807–820, 2012.

BALDEA, M.; HARJUNKOSKI, I. Integrated production scheduling and process control: A systematic review. *Computers & Chemical Engineering*, Elsevier, v. 71, p. 377–390, 2014.

CAMACHO, E. F.; ALBA, C. B. *Model predictive control*. [S.l.]: Springer science & business media, 2013.

HIDALGO, P. M.; BROSILOW, C. Nonlinear model predictive control of styrene polymerization at unstable operating points. *Computers & chemical engineering*, Elsevier, v. 14, n. 4-5, p. 481–494, 1990.

JAISINGHANI, R.; RAY, W. On the dynamic behaviour of a class of homogeneous continuous stirred tank polymerization reactors. *Chemical Engineering Science*, Elsevier, v. 32, n. 8, p. 811–825, 1977.

MACHADO, R. A. F. et al. Otimização e controle de reatores de polimerização em batelada. 1996.

ODIAN, G. *Principles of polymerization*. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2004.

OLIVEIRA, R. C. de. *Desenvolvimento de uma estrutura adaptativa para integração de MPC e RTO e sua aplicação em um processo de polimerização de estireno*. 81 p. Monografia (Dissertação de mestrado) — Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, 2019.

OLIVEIRA, R. C. de; CARVALHO, R. F. de; ALVAREZ, L. A. Multi-model adaptive integration of real time optimization and model predictive control. *IFAC-PapersOnLine*, Elsevier, v. 52, n. 1, p. 661–666, 2019.

QIN, S. J.; BADGWELL, T. A. A survey of industrial model predictive control technology. *Control engineering practice*, Elsevier, v. 11, n. 7, p. 733–764, 2003.